

# 基于 PSO 算法的变差函数球状模型参数拟合

梁昔明, 肖晓芳

(中南大学信息科学与工程学院, 长沙 410083)

**摘 要:** 对一阶变差函数球状模型及其二阶套合结构的参数拟合进行研究, 利用粒子群优化(PSO)算法在求解非线性优化问题时收敛的快速性以及全局寻优的有效性等优势, 将待拟合球状模型的参数组合为一个粒子向量, 在 PSO 算法迭代过程中对部分粒子进行混合柯西-高斯变异, 实现变差函数球状模型最优参数的自动拟合。仿真实验结果表明, 该方法操作简单、可靠性高。

**关键词:** 粒子群优化算法; 变差函数; 球状模型; 参数拟合

## Parameter Fitting of Variogram Spherical Model Based on Particle Swarm Optimization Algorithm

LIANG Xi-ming, XIAO Xiao-fang

(School of Information Science and Engineering, Central South University, Changsha 410083, China)

**【Abstract】** This paper researches the regression of the first spherical model and its mugget structure of theoretic variogram, and takes advantages of the Particle Swarm Optimization(PSO) algorithm which has outstanding advantages in solving nonlinear optimization problems for the rapid convergence and the effectiveness of global optimization. Its combination of the parameters in the spherical model are considered as a vector, during the iteration of PSO algorithm, and mixed Cauchy-Gaussian mutation is carried out on part of the particles. The automatic regression of the spherical model is achieved. Simulation results show that this method is simple and has high reliability.

**【Key words】** Particle Swarm Optimization(PSO) algorithm; variogram; spherical model; parameter fitting

DOI: 10.3969/j.issn.1000-3428.2011.14.051

### 1 概述

在许多领域中, 数据不是纯随机变量, 其值可以渐变或突变, 且具有明显的结构性特征, 应用变差函数可实现同时描述区域化变量的空间结构性和随机性。变差函数最初用于地质统计学, 是该领域重要的计算基础和基本工具, 近年来它在更多领域表现出较高的优越性, 目前已成为图像多尺度检测中尺度大小的确定和纹理特征提取的一种有效方法<sup>[1]</sup>。在应用中, 变差函数拟合结果的优劣是影响其求解精度的关键, 然而当前的拟合方法都不能尽如人意。

目前, 变差函数拟合的代表性方法有: 最小二乘法<sup>[2]</sup>, 极大似然法<sup>[3]</sup>, 线性规划法, 加权多项式回归法<sup>[4]</sup>, 遗传算法等。其中, 最小二乘法简单易行, 但无法确定待拟合参数的正负号, 不能适应变差函数的复杂多变情况; 极大似然法是目前使用最广泛和最普遍的方法, 但是需要求解联立的超越方程组, 有时甚至不能求解最优解; 以上 2 种求解方法均需要问题的梯度信息, 且对经验和技能有较高的要求; 遗传算法在求解非线性优化问题时具有全局寻优的特点, 无需函数连续可导等信息, 较好实现了变差函数的最优拟合, 但该算法需要调整的参数较多, 结构复杂, 影响算法执行效率。粒子群优化(Particle Swarm Optimization, PSO)算法<sup>[5]</sup>是近年来提出的一种基于群智能的全局优化算法。它直接用实数编码、收敛速度快、设置参数少、不要求连续可导等条件, 能有效地解决复杂的非线性优化问题, 已在函数优化、组合优化以及其他一些工程领域得到广泛应用。由于变差函数的最优拟合实质上是求解最优无偏的过程, 因此可将该拟合问题转化为函数优化问题<sup>[6]</sup>。鉴于此, 本文通过设置合理的适应值函数, 利用改进的 PSO 算法实现变差函数参数自动拟合。

### 2 变差函数原理

#### 2.1 变差函数定义

在相距为  $h$  的 2 个空间点  $x$  和  $x+h$  的参数值  $Z(x)$  和  $Z(x+h)$  之间的方差称为变差函数, 其数学表达式为:

$$\gamma^*(h) = \frac{1}{2} E[Z(x) - Z(x+h)]^2 = \frac{1}{2N(h)} \sum_{j=1}^{N(h)} [Z(x_j) - Z(x_j+h)]^2 \quad (1)$$

其中,  $h$  为滞后距, 即  $x_j$  和  $x_j+h$  2 点之间的距离;  $Z(x)$ 、 $Z(x+h)$  分别为  $x_j$  和  $x_j+h$  点的实测值(单位与研究的区域化变量相同);  $N(h)$  为相距  $h$  的数据对数;  $\gamma^*(h)$  为计算的变差函数值。

#### 2.2 变差函数理论模型

变差函数理论模型有球状模型、指数模型、高斯模型、幂函数模型、对数模型等, 其中, 球状模型的应用最广泛。

若变差函数在原点附近的小范围内表现出线性行为, 在大距离时变得较缓, 用一阶球状模型拟合可得到理想结果, 其数学表达式为:

$$\gamma(h) = \begin{cases} 0 & h = 0 \\ C_0 + C \left( \frac{3}{2} \cdot \frac{h}{a} - \frac{1}{2} \cdot \frac{h^3}{a^3} \right) & 0 < h < a \\ C_0 + C & h > a \end{cases} \quad (2)$$

**基金项目:** 国家自然科学基金资助项目(60874070); 中南大学研究生学位论文创新基金资助项目“过程控制系统设定点全局优化的粒子群算法研究”(2009ssxt190)

**作者简介:** 梁昔明(1967—), 男, 教授、博士生导师, 主研方向: 智能计算, 进化计算; 肖晓芳(通讯作者), 硕士研究生

**收稿日期:** 2011-02-24 **E-mail:** xiaoxf001@163.com

其中,  $C_0$  为块金效应值, 它是基于滞后尺度下的变异性大小的标志, 表征小于观测点最小间距的所有微观变化的总和;  $C_0 + C$  为基台值, 它表征研究区内变异性大小的极限值;  $a$  为变程, 它表征区域化变量在其邻域内的影响半径或最大影响距离。

一阶变差函数球状模型参数的拟合是在满足  $C_0 \geq 0$ ,  $C > 0$ ,  $a > 0$  的条件下, 求出模型中的参数  $C_0$ 、 $C$ 、 $a$ , 使拟合的曲线为最优。

对于变差函数曲线前端很陡、后端较缓这类变异性很大的空间变量, 需要采用多个模型进行套合才能取得理想的拟合结果, 其中, 套合结构大多采用二阶球状模型, 其数学表达式为:

$$\gamma(h) = \begin{cases} 0 & h = 0 \\ C_0 + C_1 \left( \frac{3}{2} \cdot \frac{h}{a_1} - \frac{1}{2} \cdot \frac{h^3}{a_1^3} \right) + C_2 \left( \frac{3}{2} \cdot \frac{h}{a_2} - \frac{1}{2} \cdot \frac{h^3}{a_2^3} \right) & 0 < h < a_1 \\ C_0 + C + C_2 \left( \frac{3}{2} \cdot \frac{h}{a_2} - \frac{1}{2} \cdot \frac{h^3}{a_2^3} \right) & a_1 < h < a_2 \\ C_0 + C_1 + C_2 & h > a_2 \end{cases} \quad (3)$$

其中,  $0 < a_1 < a_2$ , 其余参数含义同一阶球状模型。

二阶套合球状模型参数拟合的具体过程为: 在曲线转折点  $a_1$ 、 $a_2$  处把全部已知数据分成  $(0, a_1]$ 、 $(a_1, a_2]$  这 2 个部分, 前区  $(0, a_1]$  的数据用来拟合第 1 段球状模型, 后区  $(a_1, a_2]$  的数据用来拟合第 2 段球状模型, 其中, 转折处的分界点既作为前区最后一个数据点, 也作为后区的第 1 个数据点。

### 3 PSO 算法原理及其改进

#### 3.1 基本 PSO 算法

PSO 算法通过群体中个体(潜在解)之间的协作、信息共享以及迭代寻找最优解。

在基本 PSO 算法中, 本文分别用  $X_i = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{iD})^T$  和  $V_i = (v_{i1}, v_{i2}, \dots, v_{iD})^T$  表示粒子  $i$  的位置向量和速度向量, 其中,  $D$  是粒子的维数。  $P_i = (P_{i1}, P_{i2}, \dots, P_{iD})^T$  表示粒子  $i$  到目前为止的最好位置向量值;  $P_g = (P_{g1}, P_{g2}, \dots, P_{gD})^T$  表示整个群体搜索到的最好位置向量值。粒子  $i$  按式(4)和式(5)更新速度和位置, 即:

$$v_{id}^{k+1} = wv_{id}^k + c_1 \text{rand}_1() (P_{id}^k - x_{id}^k) + c_2 \text{rand}_2() (p_{gd}^k - x_{id}^k) \quad (4)$$

$$x_{id}^{k+1} = x_{id}^k + v_{id}^{k+1} \quad (5)$$

其中,  $k$  为当前进化代数;  $\text{rand}_1()$ 、 $\text{rand}_2()$  为均匀分布于  $(0, 1)$  区间的随机数;  $c_1$ 、 $c_2$  为学习因子, 取  $c_1 = c_2 = 2$ ;  $V_i$  是粒子的速度向量, 其最大取值为常量  $V_{\max}$ , 决定当前位置与最好位置之间区域的精度;  $w$  为惯性权重, 是调整算法全局搜索能力和局部搜索能力的平衡因子, 较大的  $w$  有利于跳出局部极小点, 较小的  $w$  有利于算法收敛。随着迭代的进行, 由最大的  $w_{\max}$  线性减小到  $w_{\min}$ , 即:

$$w = w_{\max} - (w_{\max} - w_{\min}) \cdot \text{iter} / \text{max iter} \quad (6)$$

其中,  $\text{iter}$  为当前迭代次数;  $\text{max iter}$  为总迭代次数; 本文算法取  $w_{\max} = 0.6$ 、 $w_{\min} = 0.1$ 。

#### 3.2 改进的 PSO 算法

大量研究表明, 标准 PSO 算法易于陷入局部最优和后期收敛速度减缓等缺点, 因此, 本文提出一种有效的改进方法。当进行 10 代 PSO 算法迭代后, 随机选取粒子总数的 20% 进行混合柯西-高斯变异, 若变异后粒子的适应值较变异前更

优, 则把当前适应值作为该粒子的适应值, 以增加粒子的多样性, 从而避免陷入局部最优。该混合的变异算子可自适应地调节步长, 不仅能避免不同变异之间进行切换, 而且使得算法能以更高概率向较优的迭代方向进行。具体变异过程如下: 在每次变异中, 最先采用柯西变异, 保证较大的变异步长, 若变异后得到的变量不在定义域内, 则进行高斯变异; 若变异后得到的变量不在定义域内, 则将变量值设为上限或下限。高斯和柯西变异分别如下:

$$x_d^{k+1} = x_d^k + 0.1 \cdot N_d(0, 1) \quad (7)$$

$$x_d^{k+1} = x_d^k + 0.1 \cdot \delta_d \quad (8)$$

其中,  $x_d^k$  和  $x_d^{k+1}$  分别表示第  $d$  个决策变量在变异前和变异后的值;  $N_d(0, 1)$  表示均值为 0、标准差为 1 的高斯随机数;  $\delta_d$  表示柯西随机数。

#### 3.3 算法具体实现

将待拟合的参数组合看作一个粒子, 代表一个最优候选解; 将待拟合参数的个数定义为粒子的维数。本文适应值函数确定如下:

$$F(i) = \sum_{j=1}^N [\gamma(h_{ij}) - \gamma^*(h_{ij})]^2 \quad (9)$$

在一阶球状模型中, 粒子  $i$  的适应值函数为:

$$F(i) = \begin{cases} \sum_{j=1}^N [\gamma^*(h_j)]^2 & h = 0 \\ \sum_{j=1}^N [C_0 + C_1 \left( \frac{3}{2} \cdot \frac{h_j}{a} - \frac{1}{2} \cdot \frac{h_j^3}{a^3} \right) - \gamma^*(h_j)]^2 & 0 < h < a \\ \sum_{j=1}^N [C_0 + C - \gamma^*(h_j)]^2 & h > a \end{cases} \quad (10)$$

在二阶套合球状模型中, 粒子  $i$  的适应值函数为:

$$F(i) = \begin{cases} \sum_{j=1}^N [\gamma^*(h_j)]^2 & h = 0 \\ \sum_{j=1}^N [C_0 + C_1 \left( \frac{3}{2} \cdot \frac{h_j}{a_1} - \frac{1}{2} \cdot \frac{h_j^3}{a_1^3} \right) + C_2 \left( \frac{3}{2} \cdot \frac{h_j}{a_2} - \frac{1}{2} \cdot \frac{h_j^3}{a_2^3} \right) - \gamma^*(h_j)]^2 & 0 < h < a_1 \\ \sum_{j=1}^N [C_0 + C_1 + C_2 \left( \frac{3}{2} \cdot \frac{h_j}{a_2} - \frac{1}{2} \cdot \frac{h_j^3}{a_2^3} \right) - \gamma^*(h_j)]^2 & a_1 < h < a_2 \\ \sum_{j=1}^N [C_0 + C_1 + C_2 - \gamma^*(h_j)]^2 & h > a_2 \end{cases} \quad (11)$$

其中,  $F(i)$  为粒子  $i$  的适应值函数;  $h_{ij}$  为粒子  $i$  的第  $j$  个滞后距;  $\gamma(h_{ij})$  为粒子  $i$  第  $j$  个一阶或二阶理论球状模型对应变差函数值;  $\gamma^*(h_{ij})$  为粒子  $i$  第  $j$  个滞后距根据式(1)计算得到的变差函数值。

#### 3.4 改进的 PSO 算法的拟合过程

变差函数参数最优拟合的具体迭代步骤如下:

**Step1** 确定算法参数, 设当前迭代次数为  $k=0$ , 其中, 变量初始值为对应参数定义域内服从均匀分布的随机数, 种群规模为  $N=30$ 。

**Step2** 根据式(10)或式(11)计算所有粒子的适应度值  $F(i)$ , 设定各个个体最优位置向量  $p_i$  和全局最优位置向量  $p_g$ 。

**Step3** 分别根据式(4)和式(5), 更新粒子的速度和位置, 其中, 惯性权重按式(6)运算。每个粒子将适应值与其经历过的最好位置  $p_i$  进行比较, 如果较好, 则将其作为当前的最好位置, 更新  $p_i$ ; 每个粒子将其适应值与全局所经历的最好位置  $p_g$  进行比较, 如果较好, 则将当前值设为该群体的最好位置, 更新  $p_g$ 。

**Step4** 如果当前迭代次数  $k$  是 10 的倍数, 即  $\text{mod}(t, 10)=0$ , 则随机选择总粒子数的 20%按式(7)和式(8)进行混合柯西-高斯变异, 并按上文所述变异过程更新相应适应值。

**Step5** 如果迭代拟合过程满足终止条件(最大迭代次数), 则输出最优解及最优目标函数值; 否则, 转向 Step2。

4 算例仿真及分析

本算例参考文献[7]中某矿钻孔中  $\text{V}_2\text{O}_5$  品位的变差函数值, 见表 1。

表 1  $\text{V}_2\text{O}_5$  品位的实验变差及理论变差函数值

$h_j$	$N_j$	$\gamma^*(h_j)$	$\gamma(h_j)^1$	$\gamma(h_j)^2$
0.5	19	0.73	0.920 757 270	0.743 723 75
1.0	18	1.16	1.135 166 200	1.124 520 20
1.5	18	1.44	1.344 143 570	1.448 105 17
2.0	17	1.65	1.544 973 580	1.685 872 93
2.5	17	1.79	1.734 940 430	1.824 571 23
3.0	16	2.00	1.911 328 370	1.942 642 44
3.5	15	2.07	2.071 421 580	2.054 860 94
4.0	15	2.18	2.212 504 300	2.160 251 24
4.5	14	2.25	2.331 860 730	2.257 837 91
5.0	14	2.30	2.426 775 090	2.346 645 49
5.5	13	2.44	2.494 531 590	2.425 698 52
6.0	13	2.53	2.532 414 440	2.494 022 15
6.5	12	2.51	2.539 733 290	2.550 639 12
7.0	12	2.59	2.539 733 290	2.594 575 78
7.5	11	2.64	2.539 733 292	2.624 856 08

在表 1 中,  $h_j$  和  $\gamma^*(h_j)$  的数量级相同;  $\gamma(h_j)^1$  是一阶球状模型的理论变差函数值;  $\gamma(h_j)^2$  是二阶套合球状模型的理论变差函数值。

采用改进的 PSO 算法, 分别用一阶球状模型和二阶套合球状模型进行参数最优拟合。为比较算法的性能和减少偶然性的影响, 独立运行本文算法 50 次。

当选用一阶球状模型时, 粒子群维数为  $D=3$ ; 待拟合参数的取值范围分别为:  $C_0=[0, 5]$ ,  $C=[0, 10]$ ,  $a=[5, 10]$ 。求得当模型参数分别为  $C_0=0.294$ 、 $C=5.377$ 、 $a=6.40$  时, 取得函数最优平均适应值为 2.31。由表 1 中的理论变差函数值  $\gamma(h_j)^1$  和图 1 中的变差函数拟合曲线可得, 该方法取得了较理想的拟合结果。

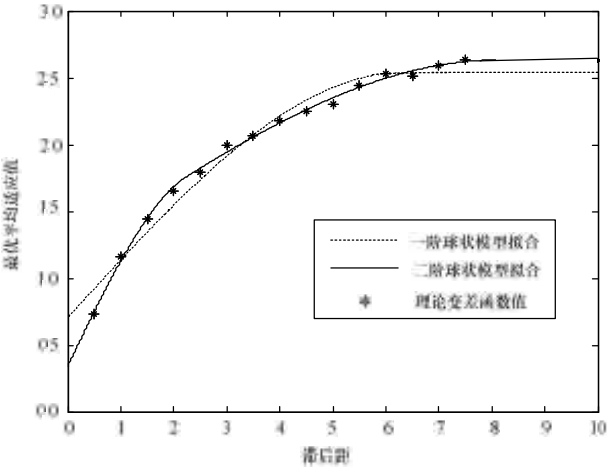


图 1 变差函数的球状模型参数最优拟合

当选用二阶套合球状模型时, 粒子群维数为  $D=5$ ; 待拟合参数取值范围分别为:  $C_0=[0, 3]$ ,  $C_1=[0, 3]$ ,  $C_2=[0, 3]$ ,  $a_1=(0, 5]$ ,  $a_2=(0, 10]$ 。由表 1 中的理论变差函数值  $\gamma(h_j)^2$  和图 1 中的变差函数拟合曲线可知, 二阶套合球状模型取得了更理

想的拟合结果。

表 2 列出了当选用二阶套合球状模型时, 各参数随迭代次数的变化。其中, 最大允许误差是 0.02, 即若所得函数适应值小于 0.02, 认为寻优成功。由表 2 可以看出, 随着总迭代次数的增加, 该算法的成功率增加, 即可靠性提高。当该算法总迭代次数增加至 1 000 代时成功率达到 1, 从而保证了本文方法的可靠性。

表 2 二阶套合球状模型最优值随迭代次数的变化

迭代次数	平均最优值	成功率	$C_0$	$C_1$	$C_2$	$a_1$	$a_2$
100	0.340	0.4	0.160	0.805	1.524	2.799	9.834
300	0.270	0.6	0.325	0.818	1.483	2.158	8.008
600	0.012	0.8	0.361	0.804	1.458	2.279	8.176
1 000	0.010	1.0	0.341	0.891	1.426	2.392	8.577

为了进一步对比不同拟合方法与实际数据之间的吻合程度, 本文引入相似度的概念:

$$r = E\{[h - E(h)] \cdot [\gamma(h) - E(\gamma(h))]\} / \sqrt{[(h - E(h))^2] \cdot [\gamma(h) - E(\gamma(h))]^2} \quad (12)$$

其中,  $r$  为相似度, 取值范围为  $0 \leq r \leq 1$ ,  $r$  越大, 表明相关性越强, 拟合程度越好;  $E()$  表示求取期望值。

由式(12)计算可得, 本文一阶球状模型拟合时的相似度为  $r=0.880 3$ , 本文二阶套合球状模型拟合时的相似度为  $r=0.998 7$ , 利用线性规划法<sup>[8]</sup>, 采用二阶套合球状模型拟合时的相似度为  $r=0.978 8$ 。由此可知, 本文方法取得了更精确的拟合结果。另外, 本文直接利用改进的 PSO 算法即可实现精确寻优, 不需要拟合后期手工调整参数, 实现了参数寻优的自动化。

5 结束语

本文充分利用 PSO 算法在解决非线性优化问题时的优势, 实现变差函数球状模型参数最优的自动拟合, 克服了当前常用拟合方法需要研究者过多参与和方法通用性不强的缺点。

参考文献

[1] 吴刚. 基于变差函数及隐含多项式曲线的图像物体分割描述与识别方法研究[D]. 合肥: 合肥工业大学, 2001.

[2] Cressie N. Fitting Variogram Models by Weighted Least Squares[J]. Mathematical Geology, 1985, 17(5): 563-567.

[3] Mardia K V, Marshall R J. Maximum Likelihood Parameter Estimation of Models for Residual Covariance in Spatial Regression[J]. Biometrika, 1984, 71(1): 135-138.

[4] 胡小荣, 俞茂宏. 理论变差函数球状模型的加权线性规划法拟合[J]. 地质与勘探, 2001, 37(5): 45-48.

[5] Kennedy J, Eberhart R C. Particle Swarm Optimization[C]// Proceedings of International Conference on Neural Networks. [S. l.]: IEEE Press, 1995: 1942-1948.

[6] 刘锦萍, 郁金祥. 基于 PSO 算法的 probit 模型参数估计[J]. 计算机工程, 2009, 35(23): 198-200.

[7] 孙洪泉. 地质统计学及其应用[M]. 徐州: 中国矿业大学出版社, 1990: 83-85.

[8] 陈永良, 刘大有. 地质统计学 K-阶套合球状模型参数的自动模拟[J]. 物探化探计算技术, 1999, 21(1): 24-29.

编辑 陆燕菲